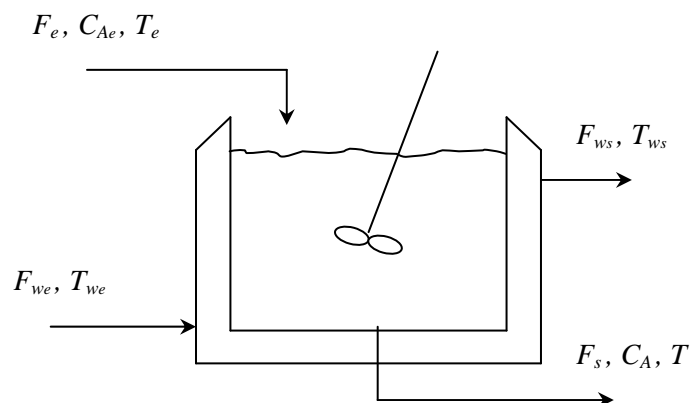


Matemática – Aula 2

Sistemas de Equações Algébricas

Considerando o problema de um reator contínuo de tanque agitado (CSTR) não-isotérmico, com propriedades físicas constantes (ρ , c_p):



Para o caso de uma reação de ordem n :

$$r_A = k C_A^n, \quad \text{onde } k(T) = k_0 \cdot e^{-\frac{E}{RT}}$$

temos as seguintes equações de balanço de massa e energia do modelo:

$$\frac{dV}{dt} = F_e - F_s$$

$$\frac{d(V C_A)}{dt} = F_e C_{Ae} - F_s C_A - k C_A^n V$$

$$\rho V c_p \frac{dT}{dt} = F_e \rho c_p (T_e - T) + (-\Delta H_r) k C_A^n V - U A_t (T - T_w)$$

onde F_e e F_s são as vazões volumétricas de entrada e saída, respectivamente, V é o volume do meio reacional, C_A é a concentração molar do reagente, T e T_w são as temperaturas do meio reacional e do fluido de refrigeração, respectivamente, ΔH_r é a entalpia de reação, U é o coeficiente global de transferência de calor e A_t é a área de troca térmica.

No estado estacionário:

$$F_e = F_s \equiv F$$

$$\frac{F}{V}(C_{Ae} - C_A) = k C_A^n$$

$$\frac{F}{V}(T - T_e) + \frac{U A_t}{\rho C_p V}(T - T_w) = \frac{(-\Delta H_r) k C_A^n}{\rho C_p}$$

Substituindo a equação de balanço de massa do componente A no balanço de energia:

$$\frac{F}{V}(T - T_e) + \frac{U A_t}{\rho C_p V}(T - T_w) = \frac{F(-\Delta H_r)}{\rho C_p V}(C_{Ae} - C_A)$$

e definindo as variáveis adimensionais:

$$x_1 \equiv \frac{C_A}{C_{Ae}} \quad \text{e} \quad x_2 \equiv \frac{T - T_e}{T_e}$$

temos:

$$(1 - x_1) = k \tau C_{Ae}^{n-1} x_1^n = D_a C_{Ae}^{n-1} x_1^n \exp\left(\gamma \frac{x_2}{1 + x_2}\right)$$

$$x_2 = \beta + \alpha (1 - x_1)$$

onde α , β , γ e D_a estão definidos no capítulo anterior. Ou seja, um sistema de equações algébricas:

$$F(x) = \begin{bmatrix} f_1(x_1, x_2) \\ f_2(x_1, x_2) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 - x_1 - D_a C_{Ae}^{n-1} x_1^n \exp\left(\gamma \frac{x_2}{1 + x_2}\right) \\ x_2 - \beta - \alpha (1 - x_1) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Neste caso em particular, a segunda equação poderia ser substituída na primeira para eliminar a variável x_1 , resultando em uma equação algébrica a uma variável, mas, para efeitos de ilustração, vamos manter como um sistema de equações a duas variáveis.

Para o caso sem reação química ($\alpha = 0$ e $D_a = 0$), resulta no sistema linear:

$$F(x) = \begin{bmatrix} 1 - x_1 \\ x_2 - \beta \end{bmatrix} \Rightarrow F(x) = A x - b \Rightarrow x = A^{-1} b$$

$$A = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} 1 \\ -\beta \end{bmatrix}$$

$$A^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \Rightarrow x = \begin{bmatrix} 1 \\ \beta \end{bmatrix}$$

Existe uma grande variedade de métodos para solução de sistemas lineares, sendo muitos deles dependentes da estrutura da matriz A (matriz densa, esparsa, simétrica, bloco-diagonal, etc.). Os métodos mais conhecidos para solução de sistemas lineares são:

métodos diretos:

- eliminação Gaussiana
- fatorações (LU, LL^T , LDL^T , QR, ...)
- método de Thomas

métodos iterativos:

- método de Jacobi
- método de Gauss-Seidel
- métodos SOR
- minimização

Para o caso não-linear, trataremos da solução do sistema de equações algébricas $F(x) = 0$ pelos métodos:

- Substituições sucessivas
- Newton-Raphson

Para sistemas de equações algébricas, o procedimento de adimensionamento das variáveis com o intuito de deixá-las com a mesma ordem de grandeza é crucial para o bom desempenho dos métodos numéricos. Por exemplo, ao usarmos a norma euclidiana como uma medida da distância entre pontos de uma seqüência convergente:

$$\|x - y\| = \left(\sum_{i=1}^N (x_i - y_i)^2 \right)^{1/2}$$

E se não adimensionarmos a concentração e a temperatura para o exemplo do reator CSTR; digamos que a concentração é aproximadamente $5,0 \cdot 10^{-3}$ kmol/m³ e a temperatura 500 K, então ao calcular a distância entre dois pontos de um método iterativo:

iteração	Concentração (kmol/m ³)	Temperatura (K)
k	$5,0 \cdot 10^{-3}$	500
$k+1$	$6,0 \cdot 10^{-3}$	501

$$EA_x = \|x^{(k+1)} - x^{(k)}\| = \left[(6,0 \cdot 10^{-3} - 5,0 \cdot 10^{-3})^2 + (501 - 500)^2 \right]^{1/2} = (10^{-6} + 1^2)^{1/2} \cong 1$$

$$ER_x = \frac{\|x^{(k+1)} - x^{(k)}\|}{\|x^{(k)}\|} = \frac{EA_x}{\|x^{(k)}\|} = \frac{1}{\left[(5,0 \cdot 10^{-3})^2 + (500)^2 \right]^{1/2}} = \frac{1}{(25 \cdot 10^{-6} + 25 \cdot 10^4)^{1/2}} \cong \frac{1}{500} = 0,002$$

Ou seja, se um erro relativo de 0,2% fosse aceitável, o procedimento iterativo encerraria antes da convergência para a solução, pois haveria um erro de 20% na concentração (100 vezes maior que o desejado).

Supondo agora que $C_{Ae} = 50,0 \cdot 10^{-3}$ e $T_e = 400$ K e aplicando os adimensionamentos definidos para o CSTR, teríamos para estas mesmas iterações:

iteração	x_1	x_2
k	0,1000	0,2500
$k+1$	0,1200	0,2525

$$EA_x = \left[(0,1200 - 0,1000)^2 + (0,2525 - 0,2500)^2 \right]^{1/2} = (4 \cdot 10^{-4} + 6,25 \cdot 10^{-6})^{1/2} \cong 0,0202$$

$$ER_x = \frac{0,0202}{\left[(0,1000)^2 + (0,2500)^2 \right]^{1/2}} = \frac{0,0202}{0,2693} \cong 0,075 = 7,5\%$$

E, neste caso, o critério de convergência ainda não teria sido satisfeito.

2.1 Métodos iterativos para sistemas lineares

Da mesma forma que os métodos diretos (visto na aula anterior), existe uma grande variedade de métodos iterativos para solução de sistemas lineares, dentre estes:

- iterações de Jacobi
- iterações de Gauss-Seidel
- iterações SOR
- Minimização
- iterações ADI
- iterações de Richardson
- iterações de Chebyshev
- Gradiente Conjugado (CG)
- Gradiente Conjugado Quadrático (CGS)
- Gradiente BiConjugado (BiCG)
- Gradiente BiConjugado Estabilizado (BiCGSTAB)
- Resíduo Mínimo Generalizado (GMRES)

Abordaremos aqui somente os quatro primeiros.

Jacobi

É um método iterativo para a solução de sistemas lineares expresso, na forma matricial, por:

$$x^{k+1} = M x^k + c \quad , \quad k = 0,1,2,\dots$$

onde $M = D^{-1} B$, $c = D^{-1} b$, $B = D - A$. Sendo D a diagonal da matriz A . O método escrito para cada elemento do vetor x apresenta a seguinte forma:

$$x_i^{k+1} = \frac{b_i - \sum_{j=1(\neq i)}^N a_{ij} x_j^k}{a_{ii}} \quad , \quad i = 1, \dots, N \quad \text{e} \quad k = 0,1,2,\dots$$

Gauss-Seidel

Este método é uma modificação do método de Jacobi, cujo princípio é de usar os novos valores de x tão logo eles estejam disponíveis. Neste caso a matriz $M = (D - L)^{-1} U$ e o vetor $c = (D - L)^{-1} b$, onde D , L e U são as matrizes diagonal, triangular inferior e triangular superior, respectivamente, extraídas da matriz $A = D - L - U$. O método escrito para cada elemento do vetor x apresenta a seguinte forma:

$$x_i^{k+1} = \frac{b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{k+1} - \sum_{j=i+1}^N a_{ij} x_j^k}{a_{ii}} \quad , \quad i = 1, \dots, N \quad \text{e} \quad k = 0,1,2,\dots$$

SOR

O método das sobre-relaxações sucessivas (SOR - *successive overrelaxation*) é uma variação do método de Gauss-Seidel pela introdução de um fator de relaxação (ω):

$$x_i^{k+1} = x_i^k + \omega (\hat{x}_i^{k+1} - x_i^k)$$

onde \hat{x}_i^{k+1} é proveniente do método de Gauss-Seidel. Tanto o método SOR, quanto o método de Gauss-Seidel, ao contrário do método de Jacobi, dependem da ordem em que as equações são resolvidas.

A convergência destes métodos iterativos é caracterizada pela matriz de iteração, M :

$$x^{k+1} = M x^k + c \quad , \quad k = 0,1,2,\dots$$

sendo convergentes se, e somente se, todos os valores característicos de M possuírem valor absoluto menor que 1. Uma condição suficiente para convergência é:

$$\|M\|_l < 1$$

onde

$$\|M\|_1 = \max_j \sum_{i=1}^N |m_{ij}| \quad \text{norma 1} \quad \|M\|_F = \sqrt{\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N m_{ij}^2} = \sqrt{\text{tr}(M \cdot M^T)} \quad \text{norma Frobenius}$$

$$\|M\|_{\infty} = \max_i \sum_{j=1}^N |m_{ij}| \quad \text{norma } \infty$$

Minimização

A solução de sistemas lineares também pode ser obtida por técnicas de otimização, através da transformação do problema $Ax = b$ em:

$$S(x) = (Ax - b)^T (Ax - b)$$

ou
$$S(x) = \frac{1}{2} x^T A x - b^T x \quad \text{no caso de } A \text{ ser simétrica e positiva definida,}$$

onde deseja-se encontrar x tal que $S(x)$ é mínimo.

2.2 Sistemas tri-diagonais

Método de Thomas: Um caso particular, muito comum, de sistemas lineares, é o sistema tri-diagonal, que pode ser representado da forma:

$$a_i x_{i-1} + b_i x_i + c_i x_{i+1} = d_i, \quad i = 1, 2, \dots, n$$

onde a é a sub-diagonal, b é a diagonal e c é a super-diagonal da matriz A , com $x_0 = 0$ e $x_{n+1} = 0$ como condições de contorno. A solução deste sistema pelo método de Thomas tem a forma:

$$x_n = \gamma_n$$

$$x_i = \gamma_i - \frac{c_i}{\beta_i} x_{i+1}, \quad i = n-1, n-2, \dots, 2, 1$$

onde

$$\beta_i = b_i - \frac{a_i c_{i-1}}{\beta_{i-1}} \quad \text{e} \quad \gamma_i = \frac{d_i - a_i \gamma_{i-1}}{\beta_i}, \quad i = 2, 3, \dots, n.$$

com $\beta_1 = b_1$ e $\gamma_1 = \frac{d_1}{\beta_1}$.

Para entendermos este procedimento, temos:

Primeira equação: $b_1 x_1 + c_1 x_2 = d_1$

Última equação: $a_n x_{n-1} + b_n x_n = d_n$

Fazendo: $x_i = \gamma_i - \frac{c_i}{\beta_i} x_{i+1} \quad i = 1, \dots, n \quad x_n = \gamma_n$

Pela primeira equação: $x_1 = \frac{d_1}{b_1} - \frac{c_1}{b_1} x_2 \quad x_1 = \gamma_1 - \frac{c_1}{\beta_1} x_2$

Logo, $\beta_1 = b_1$ e $\gamma_1 = \frac{d_1}{\beta_1}$

$$\text{Equação } i: \quad x_{i-1} = \gamma_{i-1} - \frac{c_{i-1}}{\beta_{i-1}} x_i; \quad a_i x_{i-1} + b_i x_i = d_i - c_i x_{i+1}$$

$$a_i \left(\gamma_{i-1} - \frac{c_{i-1}}{\beta_{i-1}} x_i \right) + b_i x_i = d_i - c_i x_{i+1}$$

$$\left(b_i - \frac{a_i c_{i-1}}{\beta_{i-1}} \right) x_i = (d_i - a_i \gamma_{i-1}) - c_i x_{i+1} \quad x_i = \frac{(d_i - a_i \gamma_{i-1})}{\left(b_i - \frac{a_i c_{i-1}}{\beta_{i-1}} \right)} - \frac{c_i}{\left(b_i - \frac{a_i c_{i-1}}{\beta_{i-1}} \right)} x_{i+1}$$

$$x_i = \gamma_i - \frac{c_i}{\beta_i} x_{i+1}$$

$$\boxed{\beta_i = \left(b_i - \frac{a_i c_{i-1}}{\beta_{i-1}} \right)} \quad \text{para } i = 2, \dots, n \text{ com } \beta_1 = b_1$$

$$\boxed{\gamma_i = \frac{d_i - a_i \gamma_{i-1}}{\beta_i}} \quad \text{para } i = 2, \dots, n \text{ com } \gamma_1 = \frac{d_1}{\beta_1}$$

$$\boxed{x_n = \gamma_n} \quad \boxed{x_i = \gamma_i - \frac{c_i}{\beta_i} x_{i+1}} \quad \text{para } i = n-1, n-2, \dots, 1$$

Quando x_0 e/ou x_{n+1} não são nulos, isto é $X_0 = A$ e $X_{n+1} = B$, a solução do sistema $a_i X_{i-1} + b_i X_i + c_i X_{i+1} = d_i$, usando o princípio da superposição, é expressa na forma: $X_i = x_i + A \cdot y_i + B \cdot z_i$ sendo x_i a solução do sistema apresentada acima (com $x_0 = x_{n+1} = 0$, mas $a_i x_{i-1} + b_i x_i + c_i x_{i+1} = d_i$) os termos y_i e z_i são soluções das equações homogêneas com condições de contorno não-homogêneas:

(i) $a_i y_{i-1} + b_i y_i + c_i y_{i+1} = 0$ com $y_0 = 1$ e $y_{n+1} = 0$, assim a primeira equação seria:

$$a_1 \cdot 1 + b_1 y_1 + c_1 y_2 = 0 \Rightarrow y_1 = -\frac{a_1}{b_1} - \frac{c_1}{b_1} y_2, \text{ buscando uma forma recursiva da mesma forma}$$

que na resolução anterior: $y_i = \delta_i - \frac{c_i}{\beta_i} y_{i+1}$ como $y_{n+1} = 0$, tem-se: $y_n = \delta_n$ e, em vista de:

$$y_1 = -\frac{a_1}{b_1} - \frac{c_1}{b_1} y_2: \beta_1 = b_1 \text{ e } \delta_1 = -\frac{a_1}{b_1} = -\frac{a_1}{\beta_1}.$$

$$y_{i-1} = \delta_{i-1} - \frac{c_{i-1}}{\beta_{i-1}} y_i, \text{ assim: } a_i y_{i-1} + b_i y_i = \left(b_i - a_i \frac{c_{i-1}}{\beta_{i-1}} \right) y_i + a_i \delta_{i-1}, \text{ mas:}$$

$a_i y_{i-1} + b_i y_i + c_i y_{i+1} = 0$ e identificando: $\beta_i = b_i - a_i \frac{c_{i-1}}{\beta_{i-1}} \Rightarrow \beta_i y_i = -a_i \delta_{i-1} - c_i y_{i+1}$, obtendo-se a mesma forma recursiva de determinação de β_i e $\delta_i = -\frac{a_i \delta_{i-1}}{\beta_i}$. Deste modo:

$$\boxed{\beta_i = \left(b_i - \frac{a_i c_{i-1}}{\beta_{i-1}} \right)} \quad \text{para } i = 2, \dots, n \text{ com } \beta_1 = b_1$$

$$\boxed{\delta_i = -\frac{a_i \delta_{i-1}}{\beta_i}} \quad \text{para } i = 2, \dots, n \text{ com } \delta_1 = -\frac{a_1}{\beta_1}$$

$$\boxed{y_n = \delta_n} \text{ e } \boxed{y_i = \delta_i - \frac{c_i}{\beta_i} y_{i+1}} \quad \text{para } i = n-1, n-2, \dots, 1$$

(ii) $a_i z_{i-1} + b_i z_i + c_i z_{i+1} = 0$ com $z_0 = 0$ e $z_{n+1} = 1$, assim a primeira equação seria:

$$b_1 z_1 + c_1 z_2 = 0 \Rightarrow z_1 = -\frac{c_1}{b_1} z_2, \text{ buscando uma forma recursiva da mesma forma que nas}$$

resoluções anteriores: $z_i = \lambda_i - \frac{c_i}{\beta_i} z_{i+1}$ como $z_{n+1} = 1$, tem-se: $z_n = \lambda_n - \frac{c_n}{\beta_n}$ e, em vista de:

$$z_1 = -\frac{c_1}{b_1} z_2: \beta_1 = b_1 \text{ e } \lambda_1 = 0.$$

$$z_{i-1} = \lambda_{i-1} - \frac{c_{i-1}}{\beta_{i-1}} z_i, \text{ assim: } a_i z_{i-1} + b_i z_i = \left(b_i - a_i \frac{c_{i-1}}{\beta_{i-1}} \right) y_i + a_i \lambda_{i-1}, \text{ mas:}$$

$a_i z_{i-1} + b_i z_i + c_i z_{i+1} = 0$ e identificando: $\beta_i = b_i - a_i \frac{c_{i-1}}{\beta_{i-1}} \Rightarrow \beta_i z_i = -a_i \lambda_{i-1} - c_i z_{i+1}$, obtendo-

se a mesma forma recursiva de determinação de β_i e $\lambda_i = -\frac{a_i \lambda_{i-1}}{\beta_i}$. Deste modo:

$$\boxed{\beta_i = \left(b_i - \frac{a_i c_{i-1}}{\beta_{i-1}} \right)} \quad \text{para } i = 2, \dots, n \text{ com } \beta_1 = b_1$$

$$\lambda_i = -\frac{a_i \lambda_{i-1}}{\beta_i} \text{ para } i = 2, \dots, n \text{ com } \lambda_1 = 0 \Rightarrow \lambda_i = 0 \text{ para } i = 1, \dots, n$$

$$\boxed{z_{n+1} = 1} \text{ e } \boxed{z_i = -\frac{c_i}{\beta_i} z_{i+1}} \quad \text{para } i = n, n-1, \dots, 1$$

Observe que as soluções dos itens (i) e (ii) acima também podem ser obtidas diretamente pelas relações recursivas do sistema original bastando fazer:

$$(i) \quad d_1 = -a_1 y_0 \text{ e } d_i = 0, \quad i = 2, 3, \dots, n$$

$$(ii) \quad d_n = -c_n z_{n+1} \text{ e } d_i = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n-1$$

e considerar ambas as condições de contorno nulas ($x_0 = 0$ e $x_{n+1} = 0$), pois elas já foram embutidas em d_1 e d_n , respectivamente. Ao final deve-se lembrar que y_0 e z_{n+1} são dados.

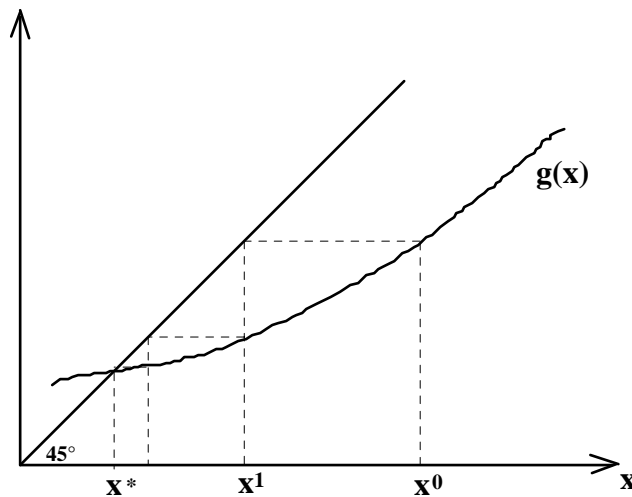
2.3 Método das Substituições Sucessivas

No método das substituições sucessivas para uma variável, o processo iterativo é aplicado à equação algébrica na forma modificada:

$$x = g(x)$$

da equação $f(x) = 0$, que pode ser obtida por um rearranjo interno desta equação ou pela simples adição de x em ambos os lados da igualdade. Assim,

$$x^{(k+1)} = g(x^{(k)}), \quad k = 0, 1, 2, \dots$$



que convergirá para a solução x^* se, para alguma constante $0 < \rho < 1$,

$$|g(x^{(k)}) - g(x^*)| \leq \rho |x^{(k)} - x^*|$$

Isto é, se $g(x)$ for um mapeamento contrativo. Esta relação pode ser vista expandindo $f(x) = x - g(x)$ em série de Taylor em torno da solução x^* e truncando no segundo termo:

$$x - g(x) = f(x) \approx f(x^*) + f'(x^*)(x - x^*)$$

Como $f(x^*) = 0$, então:

$$x - g(x) \approx (1 - g'(x^*))(x - x^*) = (x - x^*) - g'(x^*)(x - x^*)$$

Como x^* é um ponto fixo, isto é, $x^* = g(x^*)$, obtemos:

$$g(x) - g(x^*) \approx g'(x^*)(x - x^*)$$

Note que este resultado também pode ser obtido pela expansão em série de Taylor de $g(x)$ em torno de x^* .

Aplicando o módulo nesta expressão e comparando com a desigualdade acima, chegamos a:

$$|g(x) - g(x^*)| \approx |g'(x^*)| \cdot |x - x^*|$$

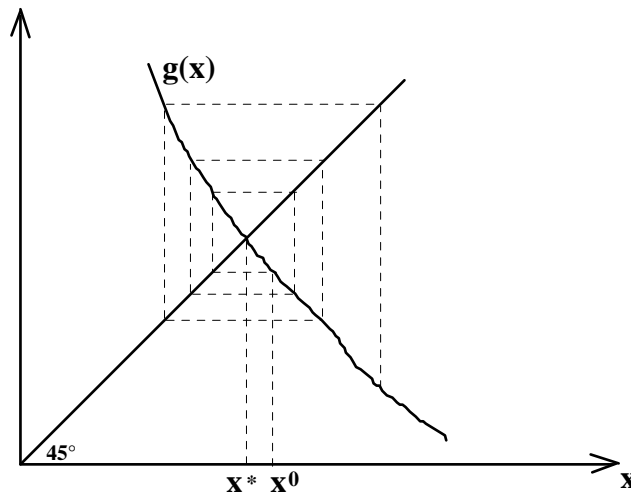
$$|g'(x^*)| \leq \rho < 1$$

Portanto, se $|g'(x^*)| \geq 1$ o processo iterativo não converge. Além disto, a expressão acima escrita para a k -ésima iteração:

$$|x^{(k+1)} - x^*| \approx |g'(x^*)| \cdot |x^{(k)} - x^*|$$

mostra que o método das substituições sucessivas apresenta **convergência linear**.

O gráfico a seguir ilustra uma situação onde $|g'(x^*)| \geq 1$ e $g'(x^*) < 0$, onde a primeira condição leva a não convergência e a segunda a uma seqüência oscilatória em torno da solução.



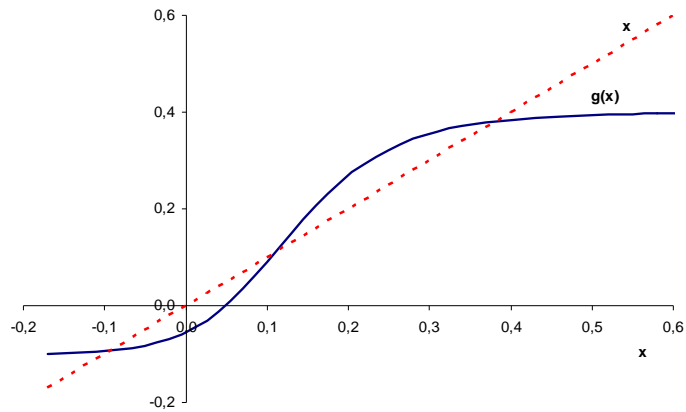
Exemplos:

1) Aplicando o método das substituições sucessivas ao caso do reator CSTR:

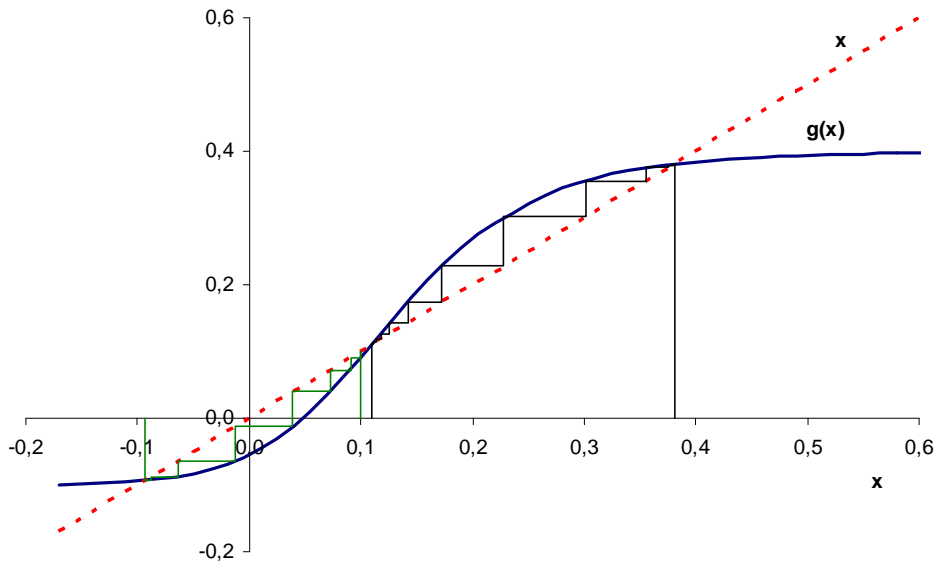
$$x = \beta + \alpha \underbrace{\frac{D_a \exp\left(\gamma \frac{x}{1+x}\right)}{1 + D_a \exp\left(\gamma \frac{x}{1+x}\right)}}_{g(x)}$$

e

$$g'(x) = \frac{\alpha \gamma}{(1+x)^2} \frac{D_a \exp\left(\gamma \frac{x}{1+x}\right)}{\left[1 + D_a \exp\left(\gamma \frac{x}{1+x}\right)\right]^2}$$

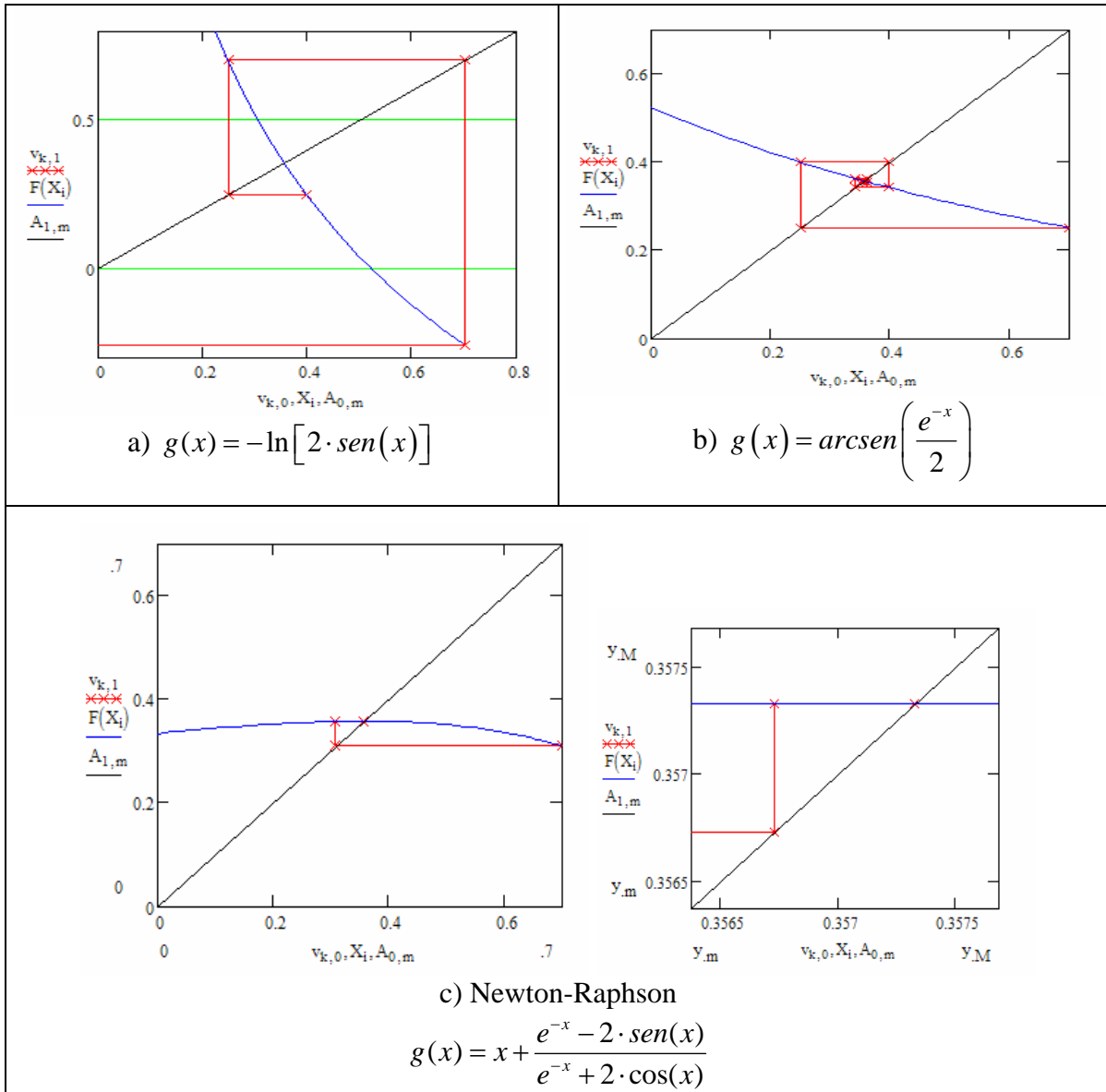


Partindo de duas estimativas iniciais distintas, $x^{(0)} = 0,1$ e $x^{(0)} = 0,11$, verificamos que a segunda raiz não pode ser obtida por esta escolha de $g(x)$, pois $|g'(x^*)| \geq 1$ neste ponto.



Iteração	$x^{(0)} = 0,1$	$x^{(0)} = 0,11$
$x^{(0)}$	0,100000	0,110000
$x^{(1)}$	0,090606	0,110264
$x^{(2)}$	0,072510	0,110787
$x^{(3)}$	0,039398	0,111822
$x^{(4)}$	-0,012058	0,113870
$x^{(5)}$	-0,063675	0,117928
$x^{(6)}$	-0,087489	0,125971
$x^{(7)}$	-0,092758	0,141875
$x^{(8)}$	-0,093613	0,172732
$x^{(9)}$	-0,093742	0,227741
$x^{(10)}$	-0,093762	0,301672
$x^{(11)}$	-0,093765	0,355769
$x^{(12)}$	-0,093765	0,375029
$x^{(13)}$		0,379499
$x^{(14)}$		0,380406
$x^{(15)}$		0,380584
$x^{(16)}$		0,380619
$x^{(17)}$		0,380626
$x^{(18)}$		0,380627
$x^{(19)}$		0,380628
$x^{(20)}$		0,380628

2) $f(x) = e^{-x} - 2 \cdot \text{sen}(x)$



CASO	a	b	c
$x^{(0)}$	0,400000	0,700000	0,700000
$x^{(1)}$	0,249954	0,250917	0,309208
$x^{(2)}$	0,703766	0,399593	0,357327
$x^{(3)}$	-0,257883	0,341920	0,357327
$x^{(4)}$	ARGUMENTO INVÁLIDO	0,363131	0,357327

Similarmente ao caso monovariável, o método das substituições sucessivas aplicado a sistemas de equações algébricas tem a forma:

$$x^{k+1} = G(x^k) \quad , \quad k = 0,1,2, \dots$$

com critério de convergência também similar:

$$\|G(x^k) - G(x^*)\| \leq \rho \|x^k - x^*\|, \quad 0 < \rho < 1.$$

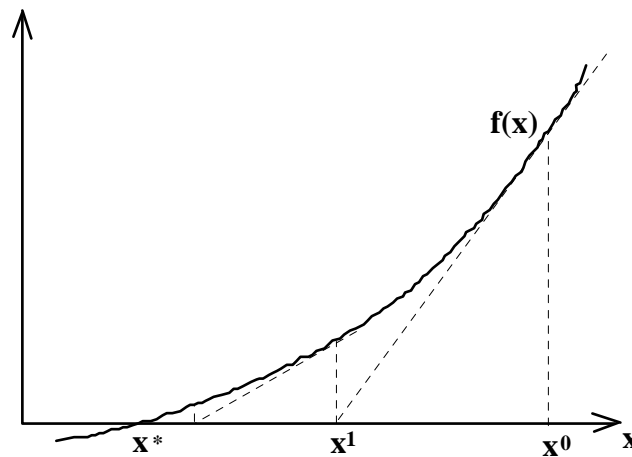
Exemplo:

$$\begin{cases} x_1 = 1 - D_a C_{Ae}^{n-1} x_1^n \exp\left(\gamma \frac{x_2}{1+x_2}\right) = g_1(x_1, x_2) \\ x_2 = \beta - \alpha(1-x_1) = g_2(x_1, x_2) \end{cases}$$

2.4 Método de Newton-Raphson

No método de Newton-Raphson a uma variável, o processo iterativo é aplicado diretamente sobre a equação algébrica $f(x) = 0$ na forma:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{f(x^{(k)})}{f'(x^{(k)})}, \quad k = 0, 1, 2, \dots$$



Isto é, a função é linearizada em torno da estimativa inicial e o próximo ponto é encontrado de modo a satisfazer esta função linearizada. Diferente da convergência do método das substituições sucessivas, que converge linearmente (pois $|x^{(k+1)} - x^*| \leq \rho |x^{(k)} - x^*|$ para $0 < \rho < 1$), o método de Newton converge quadraticamente:

$$|x^{(k+1)} - x^*| \leq \rho |x^{(k)} - x^*|^2$$

onde $0 < \rho < 1$. Para verificar tal convergência, expande-se $f(x^{(k)})$ em torno da solução x^* :

$$f(x^{(k)}) \approx f(x^*) + f'(x^*)(x^{(k)} - x^*) + \frac{f''(x^*)}{2}(x^{(k)} - x^*)^2$$

e substitui-se esta expressão na equação de Newton-Raphson, considerando que $x^{(k)}$ esteja próximo da solução de modo que se pode fazer a aproximação $f'(x^{(k)}) \approx f'(x^*)$ e sabendo que $f(x^*) = 0$:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{f'(x^*)(x^{(k)} - x^*) + \frac{f''(x^*)}{2}(x^{(k)} - x^*)^2}{f'(x^*)} = x^{(k)} - (x^{(k)} - x^*) - \frac{f''(x^*)}{2f'(x^*)}(x^{(k)} - x^*)^2$$

que rearranjando resulta em:

$$x^{(k+1)} - x^* = -\frac{f''(x^*)}{2f'(x^*)}(x^{(k)} - x^*)^2$$

Aplicando-se o módulo na equação resultante, chega-se a:

$$|x^{(k+1)} - x^*| \approx \left| \frac{f''(x^*)}{2f'(x^*)} \right| |x^{(k)} - x^*|^2$$

onde $\left| \frac{f''(x^*)}{2f'(x^*)} \right| \leq \rho < 1$. A expressão acima mostra que o método de Newton-Raphson apresenta **convergência quadrática**.

Expressando o método de Newton-Raphson como um mapeamento:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{f(x^{(k)})}{f'(x^{(k)})} = g(x^{(k)})$$

podemos analisar a convergência de maneira similar ao método das substituições sucessivas. Então expandindo $g(x)$ em série de Taylor em torno de x^* :

$$g(x) \approx g(x^*) + g'(x^*)(x - x^*) + \frac{g''(x^*)}{2}(x - x^*)^2$$

Como $g'(x^*) = \frac{f(x^*)f''(x^*)}{[f'(x^*)]^2} = 0$, é necessário utilizar o termo de segunda ordem desta

expansão onde $g''(x^*) = \frac{f''(x^*)}{f'(x^*)}$, chegando ao mesmo resultado da análise anterior.

Algoritmo: Newton-Raphson e Substituição Sucessiva

Dados ε , δ , $k_{\text{máximo}}$ e x^0

$k \leftarrow 0$

Faça

$$x^1 \leftarrow g(x^0)$$

$$y \leftarrow f(x^1)$$

$$\Delta \leftarrow |x^1 - x^0|$$

$$x^0 \leftarrow x^1$$

$$k \leftarrow k + 1$$

enquanto $(\Delta > \varepsilon$ ou $|y| > \delta)$ e $k < k_{\text{máximo}}$

Ao final do algoritmo, se $k < k_{\text{máximo}}$ então x^0 contém a raiz encontrada de $f(x)$ e y contém o valor de $f(x^0)$, senão o número máximo de iterações foi atingido sem convergência, devendo-se modificar a estimativa inicial, x^0 , ou trocar de função $g(x)$.

A função $g(x)$ deve ser escolhida de acordo com o método:

1) Método das Substituições Sucessivas: $g(x)$ é escolhida pelo usuário tomando o cuidado em assegurar que $|g'(x)| < 1$ em todo o intervalo de busca da raiz;

2) Método de *Newton-Raphson* com derivada analítica: $g(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}$;

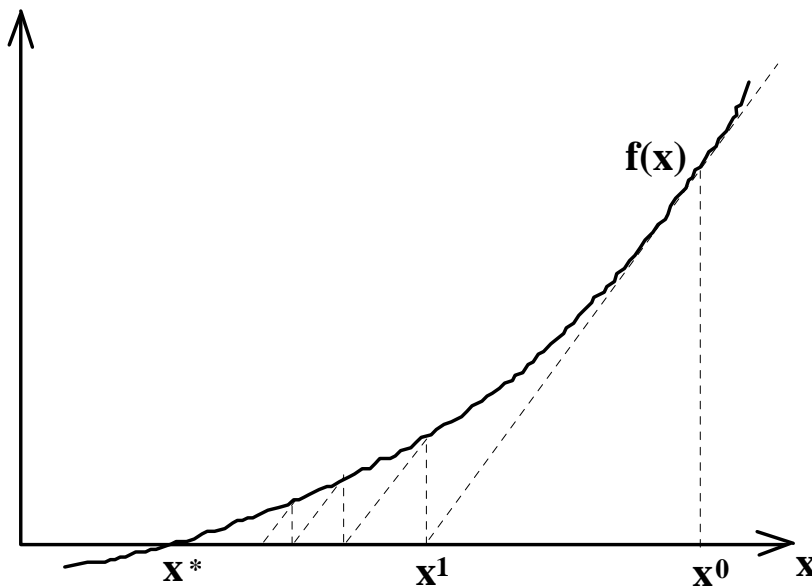
3) Método de *Newton-Raphson* com derivada numérica: $g(x) = x - \frac{f(x)}{\left(\frac{f(x+\varepsilon) - f(x)}{\varepsilon}\right)}$.

Newton-Raphson modificado

Uma modificação simples no método de Newton é considerar constante a derivada da função $f(x)$ durante todo, ou parte, do processo iterativo:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{f(x^{(k)})}{f'(x^{(m)})}, \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

onde $m \leq k$. Se $m = 0$, todas as retas que interceptam a função $f(x)$ nos pontos das iterações são paralelas.



Esta modificação tem a vantagem de calcular um número menor de derivadas da função, mas apresenta uma menor taxa de convergência.

A extensão do método de Newton ao caso multivariável implica na substituição da derivada da função $f(x)$ pela matriz das derivadas parciais de $F(x)$ com respeito a x ,

denominada de matriz Jacobiana, $J(x)$. Assim, o método de Newton-Raphson apresenta a seguinte forma:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - [J(x^{(k)})]^{-1} F(x^{(k)}) \quad , \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

onde $J_{ij}(x^{(k)}) = \frac{\partial F_i(x^{(k)})}{\partial x_j}$. A solução do sistema linear resultante pode ser resolvido tanto por métodos diretos como por métodos iterativos.

Uma modificação no método de Newton-Raphson é manter a matriz Jacobiana fixa por um determinado número de iterações:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \alpha [J(x^{(m)})]^{-1} F(x^{(k)}) \quad , \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

onde $m \leq k$ e $0 < \alpha \leq 1$. O parâmetro α , que depende da iteração, é usado para compensar o fato da matriz Jacobiana ser mantida fixa por algumas iterações. Obviamente, $\alpha = 1$ quando $m = k$.

Caso não se tenha disponível a expressão analítica da matriz Jacobiana, esta pode ser obtida numericamente por perturbações em $F(x)$:

$$J_{ij}(x^{(k)}) \cong \frac{F_i(x^{(k)} + \delta_j e_j) - F_i(x^{(k)})}{\delta_j}$$

onde e_j é o j -ésimo vetor unitário (vetor com valor 1 na posição j e zero nas demais) e δ_j é a perturbação na variável $x_j^{(k)}$, por exemplo, $\delta_j = \varepsilon_{abs}$ ou $\delta_j = \sqrt{\varepsilon} \cdot \max(|x_j^{(k)}|, \varepsilon_{abs}, 100\sqrt{\varepsilon})$, onde ε_{abs} é a tolerância absoluta para x e ε é a precisão da máquina. A maneira usual de construir esta matriz é o preenchimento coluna a coluna, ou seja, ao perturbar a variável j , calcula-se o vetor das funções $F(x^{(k)} + \delta_j e_j)$ e monta-se a coluna j da matriz. Por outro lado, existem vários softwares disponíveis para obtenção analítica da matriz, tanto por diferenciação simbólica (MAPLE, MATHCAD, MAXIMA, etc.) quanto por diferenciação automática que aplica a regra da cadeia (ADIFOR, ADOL-C, etc.).

A extensão do método da continuação para sistemas de equações algébricas segue o mesmo caminho do método de Newton-Raphson.

Lista de exercícios

1) O modelo estacionário do estágio i de uma coluna de absorção de prato, na qual ocorre uma reação química irreversível na fase líquida, é descrito pelas equações de balanço de massa abaixo:

$$L \cdot x_{i+1} + V \cdot y_{i-1} = L \cdot x_i + V \cdot y_i + H \cdot k \cdot x_i^2 \quad \text{para } i = 1, 2, \dots, N \quad (N: \text{número total de pratos})$$

L : vazão molar da fase líquida;

V : vazão molar da fase gás;

H : número de moles da fase líquida no prato i ;

k : constante de velocidade da reação [tempo^{-1}];

x_i : fração molar na fase líquida;

y_i : fração molar na fase gás.

A relação de equilíbrio entre as fases é dada pela expressão: $y_i = \frac{m \cdot x_i}{1 + \alpha \cdot x_i}$.

Utilizando os seguintes valores das variáveis e de parâmetros: $L = 40$ kmol/h; $V = 60$ kmol/h; $H = 20$ kmol; $k = \frac{1}{2} \text{ h}^{-1}$, $m = 0,75$, $\alpha = 0,05$, $N = 6$; $y_0 = 0,254237$ e $x_7 = 0$, as equações do modelo transformam-se em:

$$\frac{2}{3} \cdot y_{i-1} - \left(x_i + \frac{2}{3} \cdot y_i + \frac{x_i^2}{6} \right) + x_{i+1} = 0 \quad \text{para } i = 1, 2, 3, 4, 5, 6$$

onde $y_0 = 0,25$; $x_7 = 0$ e $y_i = \frac{0,75 \cdot x_i}{1 + 0,05 \cdot x_i}$ para $i = 1, 2, 3, 4, 5, 6$.

Para resolver este sistema, adotam-se inicialmente os valores iniciais que constituem a solução do problema linear:

$$\frac{2}{3} \cdot y_{i-1}^{(0)} - \left(x_i^{(0)} + \frac{2}{3} \cdot y_i^{(0)} \right) + x_{i+1}^{(0)} = 0 \quad \text{para } i = 1, 2, 3, 4, 5, 6$$

onde $y_0^{(0)} = 0,254327$; $x_7^{(0)} = 0$ e $y_i^{(0)} = 0,75 \cdot x_i^{(0)}$ para $i = 1, 2, 3, 4, 5, 6$

Este sistema por ser linear e tri-diagonal pode ser resolvido recursivamente resultando nos valores:

$$\begin{pmatrix} x_1^{(0)} \\ x_2^{(0)} \\ x_3^{(0)} \\ x_4^{(0)} \\ x_5^{(0)} \\ x_6^{(0)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0,168157 \\ 0,082744 \\ 0,040037 \\ 0,018684 \\ 0,008007 \\ 0,002669 \end{pmatrix}$$

- 1a) Explique sucintamente como estes valores foram determinados;
- 1b) Para resolver o problema aplicou-se o método de Newton-Raphson ao sistema original, indique abaixo como seria este procedimento indicando claramente a matriz Jacobiana correspondente;
- 1c) Como pode ser aproveitada a estrutura tri-diagonal da matriz Jacobiana no método iterativo desenvolvido?
- 1d) Na Tabela a seguir apresentam-se os valores obtidos nas 3 primeiras iterações do procedimento implementado em computador. Comente estes resultados!

x_i	Chute Inicial	Iteração 1	Iteração 2	Iteração 3
x_1	0,168157	0,162553	0,162543	0,162543
x_2	0,082744	0,078082	0,078072	0,078072
x_3	0,040037	0,037362	0,037356	0,037356
x_4	0,018684	0,017350	0,017347	0,017347
x_5	0,008007	0,007422	0,007420	0,007420
x_6	0,002669	0,002472	0,002472	0,002472

2) O método de Gauss-Jacobi consiste em resolver de forma iterativa o sistema linear de equações: $\sum_{j=1}^n a_{ij} \cdot x_j = b_i$ para $i = 1, 2, \dots, n$ na forma:

$$x_k^{(r+1)} = \frac{b_i - \sum_{j=1}^{k-1} a_{ij} \cdot x_j^{(r)} - \sum_{j=k+1}^n a_{ij} \cdot x_j^{(r)}}{a_{ik}} \quad \text{para } i = 1, 2, \dots, n. \text{ Sendo } x_j^{(r)} \text{ é o valor da variável } x_j \text{ na}$$

iteração r . Este procedimento tem a convergência garantida se: $\sum_{\substack{j=1 \\ j \neq k}}^n \left| \frac{a_{ij}}{a_{ik}} \right| < 1$ para $i = 1, 2, \dots, n$.

Baseado nestas informações descreva claramente um procedimento iterativo, inequivocamente convergente, resultante da aplicação do método de Gauss-Jacobi ao sistema linear abaixo:

$$\begin{cases} x_1 + 2 \cdot x_2 + 4 \cdot x_3 = 11 \\ 2 \cdot x_2 - x_3 = 3 \\ 4 \cdot x_1 + x_2 + 2 \cdot x_3 = 16 \end{cases}$$

3) Resolva o sistema linear abaixo:

$$\begin{pmatrix} -3 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 3 & -4 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & -6 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & -6 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3 & -4 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \\ x_6 \\ x_7 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 0 \\ 3 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix}$$

4) Resolva a equação de diferenças:

$$u_{i+2} + 4 \cdot i \cdot u_{i+1} + u_i = i \quad \text{para } i = 1, 2, 3, \dots, n \text{ com } u_1 = 0 \text{ e } u_{n+2} = 1.$$

Resolva para $n = 4, 5$ e 6 .

5) O modelo estacionário do estágio i de uma coluna de absorção de prato é descrito pela equação de balanço de massa:

$$L \cdot x_{i+1} + V \cdot y_{i-1} = L \cdot x_i + V \cdot y_i \quad \text{para } i = 1, 2, \dots, N \text{ (} N: \text{ número total de pratos)}$$

L : vazão molar da fase líquida;

V : vazão molar da fase gás;

x_i : fração molar na fase líquida;

y_i : fração molar na fase gás.

Sabendo-se que a relação de equilíbrio entre as fase é linear e dada pela expressão:

$y_i = m \cdot x_i$, sugira um procedimento iterativo para resolver este sistema conhecendo-se: L , V , m , y_0 e x_{N+1} . Para ilustrar seu procedimento adote: $L = 40$; $V = 65$; $m = 0,72$; $N = 6$; $y_0 = 0,25$ e $x_7 = 0$.

Avalie o que ocorre com as composições de saída [x_1 e y_N] quando N tende a infinito.

Bibliografia

- Cálculo Numérico: Características Matemáticas e Computacionais dos Métodos Numéricos - D. Sperandio, J.T. Mendes e L.H.M. Silva - Pearson-Prentice Hall, 2003.
- Matrix Analysis and Applied Linear Algebra - C.D. Meyer, SIAM, 2000.
- Matrix Computations - G. H. Golub e C. F. Van Loan - Johns Hopkins, 1996.
- Álgebra Linear e Aplicações - C.A. Callioli, H.H. Domingues e R.C.F. Costa - Atual Editora, 6ª ed., 1989.